数理解析研究所講究録
582巻 1986年 19-30

統計作用素における von Neumann の順序について

大阪府立桃谷高等学校　亀井栄三郎

量子力学における統計集団(ensemble)を表わすものとして von Neumann は"統計作用素"(statistical operator)を導入しました[12]。これは normalized された、即ち $\mathrm{Tr}\,A = 1$ なる positive trace class operator A のことです。よく知られている事ですが、trace class operator は、$B(H)$、つまり separable Hilbert space H 上の bounded linear operators 全体のなす algebra、上の normal state と対応しています。即ち、$A \geq 0$, trace class, $\mathrm{Tr}\,A = 1$ に対して、$\varphi_A(X) = \mathrm{Tr}(AX)$ for $X \in B(H)$ となっています。更に、von Neumann は統計作用素に対して entropy $H(A) = -\mathrm{Tr}\,A \log A$ を与えています。そしてこの $H(A)$ が concave function になる、と述べています。この意味は、2つの集団の混合は entropy を減少させない、即ち、各統計作用素が統計集団を表わすのですから、集団の混合、即ち、統計作用素の convex 和に対して次の不等式が成り立つ、という

ことです。

$$-\mathrm{Tr}((\alpha A+\beta B)\log(\alpha A+\beta B)) \geq -\alpha\,\mathrm{Tr}\,A\log A-\beta\,\mathrm{Tr}\,B\log B$$

但し、$\alpha>0$, $\beta>0$, $\alpha+\beta=1$.

von Neumann は、その text [12] の中では、上の式の変形を与えているだけで、実際には証明していません。更に、von Neumann は、$-x\log x$ をどんな concave function $f(x)$ におきかえても、これは成り立つ。証明は読者にまかせる、と述べております。

von Neumann の主張どおり、実際に H(A) が concave, つまり上の不等式が成り立つ、という事の証明を与えられたのが中村先生、梅垣先生のお二人です [11]。そこでは、H(A) が単に、concave であるばかりではなく、更に operator concave function にもなっている、ということが示されています。C. Davis もまた、[11] と同じ年の同じ号の Proc. J. Acad. [4] に、この事の証明を与えております。彼は、更に、この中で von Neumann が証明は読者にまかせよう、と述べている部分つまり、どんな concave function f に対しても、$\mathrm{Tr}\,f(A)$ が concave になる、ということの証明も与えています。この問題に関しては、最近でも多くの人が興味を示しています。例えば、Alberti-Uhlmann は、[2] において、Hermitian matrix の話として証明を与えており、D. Petz は finite von Neumann algebra上で証明し[13]、更にFack-Kosakiは、semi-finite von Neumann algebera上で証明を与えております[5]。

そこで、この事実、即ち、任意のconcave function f に対して、$\mathrm{Tr} f(A)$ も又 concave になる、という事を使って統計作用素に順序"$\subset$"を与え、これを統計順序(statistical order)と呼ぶことにします。つまり、混合の具合を測るのに特に $H(A)$ に限らなくともいいのではないか、という主張です。

A, B を統計作用素とします。このとき、$A \subset B$ であるとは、全ての concave function f に対して、$\mathrm{Tr} f(A) \leqq \mathrm{Tr} f(B)$ となることを言います。

明らかなことですが、$A \subset B$ ならば $H(A) \leqq H(B)$ ですから形としては、この統計順序の方が、entropyで測るよりもより精密だ、ということになります。

ところで、統計作用素は、$B(H)$ 上の normal state のことでもあるのですから、stateとしてこの順序を見直せばどうなるか、ということについて考えてみます。その為にまず、Alberti-Uhlmannが与えた"chaotic"という順序について述べておきます。これは C^*-algebra の states に対して与えられたものですが、これを $B(H)$ 上の normal states A, B に対して言えば次のようになります[1]。

B が A より chaotic である、とは、$B \in K(A)$ となること

をいいます。ここで K(A) は A の unitary orbits 全体の trace norm ($\|X\|_1 = \mathrm{Tr}|X|$) による closed convex hull のことです。

この chaotic については majorization と深い関連がある、ということは知られています。cf. [3], [8], [9] etc.。そこで統計作用素における majorization はどう与えられるべきかという事について考えてみます。Hardy, Littlewood, Polya は real vectors $a = (a_1, \cdots, a_n)$, $b = (b_1, \cdots, b_n)$ に次のような順序を入れました。それを majorization と呼んでやります。

$a < b$, a majorizes b, とは $\sum_1^n a_i = \sum_1^n b_i$ でかつ $\sum_1^k a_i^* \geq \sum_1^k b_i^*$, for any $k \in \{1, 2, \cdots, n\}$, のことを言います。ここで $c^* = (c_1^*, \cdots, c_n^*)$ は c の要素 $\{c_i\}$ を大きい順に並べ変えたもののことです。

この majorization の議論の中で、最も基本的で重要と思われるものに次の特徴づけがあります。

$a < b$ であることの必要十分条件は、$b = Da$ となる doubly stochastic matrix が存在することである。ここで、doubly stochastic matrix $D = (d_{ij})_{1 \leq i,j \leq n}$ とは、$d_{ij} \geq 0$ かつ $\sum_i d_{ij} = \sum_j d_{ij} = 1$ なる matrix のことをいいます。

更にこの doubly stochastic matrix D に関しては

Birkhoff の定理. $D = \sum \lambda_i P_i$ と表わせる。但し $\lambda_i \geq 0$, $\sum \lambda_i = 1$, 各 P_i は permutation matrix.

という事が知られています。さてこの majorization ですが、安藤先生は、Hermitian matrix にまで拡張されて、majorization を与えておられます[3]。又、筆者は、それを finite factor von Neumann algebra に拡張し、[3]とほぼ同様の結果を得ることができております[8]，[9]。又、最近では、日合さんが Fack-Kosaki の手法を使って、semi-finite von Neumann algebra 上に majorization を与え、同様の事をされております[6]，[7]。

さて、統計作用素の majorization についてですが、A，B を統計作用素とし、それぞれ Schatten の形式で次のように表わしておきます。$A=\sum a_i x_i\otimes x_i$，$B=\sum b_i y_i\otimes y_i$，但し、$a_i\downarrow 0$ $b_i\downarrow 0$，$\sum a_i=\sum b_i=1$，$\{x_i\}$，$\{y_i\}$ は orthonormal bases とします。このとき

$A<B$，A majorizes B，とは、$\sum_{i=1}^n a_i \geq \sum_{i=1}^n b_i$ for all $n\,(=1,2,\cdots)$ となることを言う，とします。

これは有限次元の場合をそのまま無限次元に変えたもので最も自然なものと思われます。

以上、statistical order，chaotic order，majorization と3つの順序をのべてきましたが、結論は次のようになります。

定理　統計作用素において次の順序は全て同値である。

(i) statistical order　(ii) majorization　(iii) chaotic order

以下この定理の証明の概略を述べます。

まず (ii) ならば (iii) について。

$A=\sum a_i x_i\otimes x_i$，$B=\sum b_i y_i\otimes y_i$ を上述の Schatten の形式で表わされ、$A<B$ である、としておきます。

このとき $c_n=\sum_{i=1}^{n}(a_i-b_i)$ とすると、$c_n\geqq 0$ となります。次に $A_n=\sum_{i=1}^{n-1}a_i x_i\otimes x_i+(a_n-c_n)x_n\otimes x_n$，（但し、$A_1=c_1x_1\otimes x_1$），$B_n=\sum_{i=1}^{n}b_i y_i\otimes y_i$ とします。そこで $a=(a_1,\text{----},a_{n-1},a_n-c_n)$，$b=(b_1,\text{----},b_n)$ という real vectors を考えますと $a<b$ となります。すると或る doubly stochastic matrix D が存在し、$b=Da$ となります。ところで、Birkhoff の定理により $D=\sum\lambda_i P_i$ と permutation matrices P_i の convex 和として表わすことができます。そこで各 permutation p に対して、unitary operator U_p を、

$U_p x_i=y_{p(i)}$ $1\leqq i\leqq n$，$U_p x_j=y_j$ $j>n$ として対応させると、$B_n=\sum\lambda_i U_{p_i}A_nU_{p_i}^*$ となります。そこで、任意の $\varepsilon>0$ に対し、十分大きな n を取りますと、$c_n<\varepsilon$，$\|A-A_n\|_1<\varepsilon$，$\|B-B_n\|_1<\varepsilon$ となります。よって

$$\begin{aligned}&\|\sum\lambda_i U_{p_i}AU_{p_i}^*-B\|_1\\&\leqq\|\sum\lambda_i U_{p_i}AU_{p_i}^*-\sum\lambda_i U_{p_i}A_nU_{p_i}^*\|_1+\|\sum\lambda_i U_{p_i}A_nU_{p_i}^*-B_n\|_1+\|B_n-B\|_1\\&=\|A-A_n\|_1+\|B_n-B\|_1<2\varepsilon.\end{aligned}$$

即ち、$B\in K(A)$ が得られます。

上の逆、つまり (iii) ならば (ii) については、$\sum_{i=1}^{n}a_i\geqq\sum_{i=1}^{n}b_i$ が、任意の n に対して成り立つことを示します。

$B \in K(A)$ とします。任意の $\varepsilon > 0$ に対して次を満たすような $\lambda_i \geq 0$, $\sum \lambda_i = 1$, と unitary operators $\{U_i\}$ が存在します。

$$\| B - \sum \lambda_i U_i A U_i^* \|_1 < \varepsilon .$$

次に A, B をそれぞれ上述の Schatten の形式で表わされているとし、projections P, Q で $\mathrm{Tr}\,P = \mathrm{Tr}\,Q$, $P = \sum_{i=1}^{n} x_i \otimes x_i$ とします。このとき $\mathrm{Tr}\,PA \geq \mathrm{Tr}\,QA$ が得られます。実際、

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\,P(A - a_{n+1}) &= \mathrm{Tr}\,(A - a_{n+1})_+ \\ &\geq \mathrm{Tr}\,Q(A - a_{n+1})_+ Q \\ &\geq \mathrm{Tr}\,Q(A - a_{n+1})Q = \mathrm{Tr}\,QA - a_{n+1}\mathrm{Tr}\,Q . \end{aligned}$$

次に $Q = \sum_{i=1}^{n} y_i \otimes y_i$ とすると

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n} b_i - \varepsilon &= \mathrm{Tr}\,QB - \varepsilon < \mathrm{Tr}\,Q \cdot \sum \lambda_i U_i A U_i^* \\ &= \sum \lambda_i \cdot \mathrm{Tr}\,U_i^* Q U_i A \\ &\leq \sum \lambda_i \cdot \mathrm{Tr}\,PA = \mathrm{Tr}\,PA = \sum_{i=1}^{n} a_i . \end{aligned}$$

次に (ii) ならば (i) の部分については、前述の von Neumann の注意によって得られることです。

最後に (i) ならば (ii) の部分についてですが、任意の n に対して、$f(t) = (t - a_{n+1})$ という convex function をとります。すると、$\mathrm{Tr}\,f(A) = \sum (a_i - a_{n+1})_+ = \sum_{i=1}^{n} (a_i - a_{n+1})$.

また、$\mathrm{Tr}\,f(B) = \sum (b_i - a_{n+1})_+ = \sum_{i=1}^{m} (b_i - a_{n+1})$ となります。

但し、m は、$b_m \geq a_{n+1} > b_{m+1}$ を満たす、とします。

$m \leqq n$ のとき

$$\sum_{i=1}^{n}(a_i - a_{n+1}) = \mathrm{Tr}\, f(A) \geqq \mathrm{Tr}\, f(B) = \sum_{i=1}^{m}(b_i - a_{n+1})$$
$$\geqq \sum_{i=1}^{n}(b_i - a_{n+1}).$$

$m > n$ のとき

$$\sum_{i=1}^{n}(a_i - a_{n+1}) \geqq \sum_{i=1}^{m}(b_i - a_{n+1}) \geqq \sum_{i=1}^{n}(b_i - a_{n+1}),$$

となりますから、いずれの場合も $\sum_{i=1}^{n} a_i \geqq \sum_{i=1}^{n} b_i$ が得られ、(ii) になります。

以上で定理の証明は終ります。

次に vectors の majorization の議論ででてくる doubly stochastic matrix に相当するものを次のように与えそれを doubly stochastic map と呼んでやります。即ち、

B(H) 上の unital な normal positive linear map φ が doubly stochastic map とは、任意の統計作用素 A に対して、$A \prec \varphi(A)$ となるものを言う、とします。

このとき、φ が doubly stochastic map である必要十分条件は φ が trace preserving map である、として特徴づけることができます。更に、統計作用素 A, B に対して、$A \prec B$ である為の必要十分条件として completely positive な doubly stochastic map φ で、$\varphi(A) = B$ となるものが存在する、という事も得られます。これらの証明については、少し煩雑となりますので、ここでは省略し、後の機会に回わします。

さて、この順序ですが、先程述べましたように、entropy で

測ったものより、形の上では精密になっています。実際、次のような例を与えることができます。

A, B をそれぞれSchattenの形式で表わしたとき次の係数をもつものとします。

$(a_i) = (1/2, 1/4, 1/16, 1/16, 1/16, 1/16, 0, 0, 0, \cdots\cdots)$,

$(b_i) = (1/2, 1/8, 1/8, 1/8, 1/8, 0, 0, 0, \cdots\cdots)$.

このとき、$H(A) = H(B) = 2\log 2$ となりますが、$A < B$ でも $B < A$ でもありません。しかしながら、一般に次の事は言えます。

$A < B$ かつ $H(A) = H(B)$ ならば $A \sim B$ である。

但し、$A \sim B$ とは $A < B$ かつ $B < A$ のことです。

では、これが言えるのは entropy function に限られるのか、といえば、そうではありません。例えば、$f(t) = -t^2$ という関数についても同じ事が示されます。即ち、

$A < B$, $\mathrm{Tr}A^2 = \mathrm{Tr}B^2$ ならば $A \sim B$、となります。

証明は簡単で基本的な部分は entropy function の場合と同様ですから、述べておきます。A, B を今まで同様Schattenの形式で表わしその係数をそれぞれ(a_i), (b_i)としておきます。

$$
\begin{aligned}
0 &\leqq \Sigma(a_i - b_i)^2 = \Sigma(a_i^2 - 2a_ib_i + b_i^2) \\
&= 2(\Sigma a_i^2 - \Sigma a_ib_i) = 2(\Sigma a_i^2 - \Sigma_n(\Sigma_1^n a_k)(b_n - b_{n+1})) \\
&\leqq 2(\Sigma a_i^2 - \Sigma_n(\Sigma_1^n b_k)(b_n - b_{n+1})) = 2(\Sigma a_i^2 - \Sigma b_i^2) = 0,
\end{aligned}
$$

では、もう少し一般の形でこのようなことが言えないか、ということですが、私信で、D.Petzによって次のような予想が示されました。

f を strictly concave function とする。このとき $A \prec B$ で $\mathrm{Tr} f(A) = \mathrm{Tr} f(B)$ ならば $A \sim B$ であろう。

実際、vectors の場合ですと、$a \prec b$ に対し doubly stochastic matrix D が存在して、$b = Da$ となりますから、f の strictly concavity より結論を導びけます。一般の場合についても、ここで示しました定理を使う事によって肯定的に解く事ができますので紹介します。

証明）．A, B を Schatten の形式で表わしそれぞれ係数が $(a_i), (b_i)$ である、とします。次に、係数として $(\frac{a_i+b_i}{2})$ を係数としてもつ統計作用素 C を考えます。明らかに $A \prec C \prec B$ となります。そこで定理により、$\mathrm{Tr} f(A) \leqq \mathrm{Tr} f(C) \leqq \mathrm{Tr} f(B)$ が得られます。もし、ある i_0 について、$a_{i_0} \neq b_{i_0}$ とすると、f の strictly concavity により、$f(\frac{a_{i_0}+b_{i_0}}{2}) \gneq \frac{1}{2}(f(a_{i_0}) + f(b_{i_0}))$．

よって、$\sum f(\frac{a_i+b_i}{2}) \gneq \frac{1}{2} \sum (f(a_i) + f(b_i))$．

つまり $\mathrm{Tr} f(B) \geqq \mathrm{Tr} f(C) \gneq \frac{1}{2}(\mathrm{Tr} f(A) + \mathrm{Tr} f(B)) = \mathrm{Tr} f(B)$ となり矛盾。よって全ての i に対し、$a_i = b_i$ でなければならない。

参考文献

[1] P.M. Alberti and A. Uhlmann : The order structure of states in C*- and W*-algebras, Proc. Int. Conf. on Operator algebras, Ideals, and their applications in Theoretical Physics, Teubner Texte zur Mathematick. Leipzig, 1978, 126-135.

[2] P.M. Alberti and A. Uhlmann ; Stochasticity and partial order, Dt. Verlag. Wiss., Berlin, 1982.

[3] T. Ando : Majorization, doubly stochastic matrices and comparison of eigenvalues, Lecture Note, Hokkaido Univ., 1982.

[4] C. Davis : Operator-valued entropy of a quantum mechanical measurement, Proc. Japan Acad., 37 (1961), 533-537.

[5] T. Fack and H. Kosaki ; Generalized s-numbers of τ-measurable operators, preprint.

[6] H. Hiai : Submajorization in semifinite von Neumann algebras. note, 1985.

[7] H. Hiai ; Doubly stochastic maps on semifinite von Neumann algebras, note. 1985.

[8] E. Kamei ; Majorization in finite factors, Math. Japon., 28 (1983), 495-499.

[9] E. Kamei ; Double stochasticity in finite factors, Math. Japon., 29 (1984), 903-907.

[10] E. Kamei ; An order on statistical operators implicitly introduced by von Neumann, Math. Japon., 30(1985), 891-895.

[11] M. Nakamura and H. Umegaki ; A note on the entropy for operator algebras, Proc. Japan Acad., 37(1961), 149-154.

[12] J. von Neumann ; Mathematical foundation of quantum mechanics, Princeton Univ. Press, 1985.

[13] D. Petz : Spectral scale of selfadjoint operators and trace inequalities, Preprint.